

FORMULAÇÃO HÍBRIDA DE ELEMENTOS FINITOS DE ALTA ORDEM PARA A RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE REAÇÃO-DIFUSÃO

HYBRID HIGH-ORDER FINITE ELEMENT FORMULATION FOR REACTION-DIFFUSION PROBLEMS

Emerson J. da Silva, Iury Igreja e Bernardo M. Rocha

*Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, Universidade Federal de Juiz de Fora,
Juiz de Fora - MG, Brasil, <http://www.ufjf.br/pgmc/>*

Palavras-chave: Método híbrido, métodos semi-implícitos, problemas de reação-difusão.

Resumo. Devido ao seu potencial de representar diversos fenômenos em diferentes ramos da ciência, os modelos de reação-difusão têm sido frequentemente estudados. Sob o ponto de vista computacional, diferentes metodologias podem ser aplicadas com o objetivo de construir aproximações numéricas para essa classe de problemas. Dentro desse contexto, este trabalho vislumbra a aplicação de uma formulação hibridizada de elementos finitos em conjunto com métodos semi-implícitos de integração no tempo com o intuito de se obter aproximações de alta ordem no tempo e espaço para a resolução de problemas desta natureza. Esta metodologia é caracterizada pela imposição variacional da continuidade nas interfaces dos elementos através da inserção de uma nova variável (multiplicador de Lagrange). Com a utilização de uma abordagem híbrida de elementos finitos, as aproximações das variáveis espaciais são relativamente fáceis de gerar em um sentido técnico e são computacionalmente eficientes, inclusive utilizando aproximações polinomiais de alta ordem. Entretanto, a convergência da aproximação fica limitada à ordem do método utilizado para a variável temporal. Diante desse cenário, este trabalho tem como objetivo apresentar métodos de alta ordem, como por exemplo os esquemas semi-implícitos, para a discretização temporal de equações de reação-difusão.

Keywords: Hybrid methods, semi-implicit methods, reaction-diffusion problems.

Abstract. Due to its potential to represent diverse phenomena in different branches of science, reaction-diffusion models have been extensively studied. From the computational point of view, different methodologies can be applied in order to construct approximations for this class of problems. Within this context, this work proposes the application of a high-order hybridized formulation of finite elements to solve problems of this kind. This methodology is characterized by the weak imposition of continuity in the interfaces of the elements through the insertion of a new variable (Lagrange multiplier). With the use of a hybrid finite element approach, the approximations of spatial variables are relatively easy to generate in a technical sense and are computationally efficient, even using high-order polynomial approximations. However, the convergence rate of the approximation is limited by the order of the method used for the time integration. Considering this scenario, this paper aims to present high order methods through semi-implicit schemes for the temporal discretization of reaction-diffusion equations.

1 INTRODUÇÃO

Sistemas de equações diferenciais parciais (EDPs) de reação-difusão são modelos matemáticos usualmente aplicados na química, biologia, física, entre outras, que se caracterizam pela geração de algum tipo de padrão espacial complexo. Em razão disso, modelos de reação-difusão têm sido frequentemente estudados em termos matemáticos e computacionais. Os sistemas formados por EDPs podem ser representados na forma geral

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Au + R(u), \quad (1)$$

onde u é a variável de interesse, A é um operador linear (por exemplo, o laplaciano) e R é um operador comumente não linear que representa as reações.

Sob o ponto de vista computacional, diferentes metodologias podem ser aplicadas com o objetivo de construir aproximações numéricas para essa classe de problemas. Na literatura, métodos numéricos de diferenças finitas como Crank-Nicolson e ADI são frequentemente utilizados (Hasnain et al., 2018; Pereira, 2019). Em casos onde o termo reativo é linear, o método ADI produz sistemas lineares tridiagonais, fato que pode reduzir consideravelmente o custo computacional envolvido. Entretanto, na presença de termos de reação não-lineares, torna-se necessário utilizar um esquema de resolução de sistemas não lineares (como o método de Newton) em cada passo de tempo (Hasnain et al., 2018), o que pode dificultar a obtenção da solução. Dessa forma, para contornar esse problema, é bastante comum o uso de esquemas semi-implícitos (que será discutido adiante) ou da técnica de decomposição de operadores (Strang, 1968). Dentro desse contexto, este trabalho vislumbra a aplicação de uma formulação híbrida de elementos finitos em combinação com esquemas IMEX (*Implicit-Explicit*) como por exemplo os métodos SBDF (*Semi-Implicit Backward Differentiation Formula*), para a resolução de alta ordem de problemas de reação-difusão.

Inicialmente, hibridizações de elementos finitos foram vistas como um truque de implementação com base em uma manipulação algébrica denominada condensação estática, com o propósito de reduzir consideravelmente o número de graus de liberdade do problema (Guyan, 1965; Fraeijs de Veubeke, 1965). No entanto, trabalhos seguintes demonstraram que essa técnica poderia ser reinterpretada como versões discretas de uma caracterização da solução exata, expressa em termos de soluções de problemas de contorno de Dirichlet em cada elemento da malha, corrigidas por condições de transmissão nas interfaces dos elementos (Raviart e Thomas, 1977; Cockburn e Gopalakrishnan, 2005; Fix, 1976; Brezzi e Fortin, 2012). Dessa forma, os métodos híbridos são caracterizados pela imposição de continuidade nas interfaces dos elementos através dos multiplicadores de Lagrange, gerando assim um sistema global envolvendo apenas os graus de liberdade associados ao multiplicador através da eliminação das variáveis de interesse no nível dos elementos (Igreja e Loula, 2017), fato que reduz bastante a complexidade e o custo computacional envolvido, principalmente quando são utilizadas aproximações polinomiais de alta ordem.

Com a utilização de uma abordagem híbrida de elementos finitos, as aproximações das variáveis espaciais são relativamente fáceis de gerar em um sentido técnico e são computacionalmente eficientes (por exemplo, quando comparado com outros métodos de elementos finitos), principalmente utilizando aproximações polinomiais de alta ordem. Entretanto, a convergência da aproximação fica limitada à ordem do método utilizado para a discretização temporal. Diante desse cenário, este trabalho visa também o tratamento adequado do termo transiente presente nas equações que governam problemas de reação-difusão.

2 FORMULAÇÃO VARIACIONAL HÍBRIDA SEMI-DISCRETA

A seguir, é apresentada uma formulação hibridizada de elementos finitos para um modelo de reação-difusão. Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ o domínio espacial e $[0, T]$ o intervalo de tempo. Considere o seguinte problema:

Problema modelo: Encontrar $u : \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$, tal que:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u - R(u) = f(x, y) \quad \text{em } \Omega \times [0, T], \quad (2.1)$$

$$u(x, y, t) = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega \times [0, T], \quad (2.2)$$

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y) \quad \text{em } \Omega, \quad (2.3)$$

onde f e u_0 são funções conhecidas e suficientemente regulares. Para resolver a Eq. (2) através do método de elementos finitos híbrido, considere uma malha \mathcal{T}_h formada pela união de todos os elementos K . Para as arestas e dos elementos, define-se os seguintes conjuntos: $\mathcal{E}_h = \{e; e \text{ é uma aresta de } K, K \in \mathcal{T}_h\}$ denota o conjunto de todas as arestas de todos os elementos de \mathcal{T}_h , $\mathcal{E}_h^0 = \{e \in \mathcal{E}_h; e \text{ é uma aresta interior}\}$ é o conjunto das arestas interiores e $\mathcal{E}_h^\partial = \{e \in \mathcal{E}_h; e \subset \partial\Omega\}$ o conjunto das arestas pertencentes a fronteira de Ω . Para cada elemento, associa-se um vetor unitário normal \mathbf{n}_K . Com isso, pode-se definir o problema local, no nível de cada elemento K como segue:

Problema no nível do elemento: Para cada $t \in (0, T]$, encontrar u tal que:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u - R(u) = f(x, y) \quad \text{em } K, \quad (3.1)$$

$$[\nabla u]_e = 0 \quad \forall e \in \mathcal{E}_h, \quad (3.2)$$

$$[u]_e = 0 \quad \forall e \in \mathcal{E}_h^0, \quad (3.3)$$

$$u(x, y, t) = 0 \quad \text{sobre } \mathcal{E}_h^\partial, \quad (3.4)$$

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y) \quad \text{em } K, \quad (3.5)$$

onde $[\nabla u]_e = [u]_e = 0$ definem as condições de transmissão nas interfaces dos elementos e o operador $[\cdot]$ é chamado de salto.

Sejam os seguintes espaços de dimensão finita: $\mathcal{V}_h^k = \{v_h \in L^2(\Omega); v_h|_K \in \mathbb{P}_k(K), \forall K \in \mathcal{T}_h\}$ e $\mathcal{M}_h^k = \{\mu_h \in L^2(e); \mu_h|_e \in \mathbb{P}_k(e), \forall e \in \mathcal{E}_h\}$, onde $\mathbb{P}_k(\cdot)$ denota o espaço de funções polinomiais de grau k associado aos elementos ou arestas, respectivamente. Para obter uma formulação variacional híbrida deve-se: (i) multiplicar a Eq. (3.1) por uma função $v_h \in \mathcal{V}_h^k$ e (ii) integrar por partes o termo de difusão no domínio K . Assim, chega-se a forma fraca local, dada por:

$$\left(\frac{\partial u_h}{\partial t}, v_h \right)_K + (\nabla u_h, \nabla v_h)_K - \int_{\partial K} \nabla u_h \cdot \mathbf{n}_K v_h ds - (R(u_h), v_h)_K = (f, v_h)_K, \quad (4)$$

onde $(\cdot, \cdot)_K$ denota o produto interno no espaço de aproximação ao longo do domínio K .

A integração por partes do termo difusivo produz um termo no contorno do elemento que garante a consistência do método. Para garantir as propriedades de consistência adjunta e estabilidade, adiciona-se na Eq. (4) um termo de simetrização e um termo de estabilização (Babuška,

1973), respectivamente, o que produz:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial u_h}{\partial t}, v_h \right)_K + (\nabla u_h, \nabla v_h)_K - \int_{\partial K} \nabla u_h \cdot \mathbf{n}_K v_h ds - (R(u_h), v_h)_K \\ & - \int_{\partial K} (u_h - \lambda) \nabla v_h \cdot \mathbf{n}_K ds + \int_{\partial K} \beta (u_h - \lambda) v_h ds = (f, v_h)_K, \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h^k, \end{aligned} \quad (5)$$

onde $\beta = \frac{\beta_0 k^2}{h}$ é um parâmetro de estabilização (com $\beta_0 > 0$ pré-definido e considerado constante e h um parâmetro de malha) e λ é uma nova variável inserida, representando o multiplicador de Lagrange, definida como o traço de u nas arestas.

Com a inclusão do multiplicador de Lagrange, o problema na Eq. (5) contém duas incógnitas (u e λ) para somente uma equação. Por essa razão, torna-se necessário a inclusão de mais uma equação ao problema, para que o mesmo seja resolvível. A nova equação inserida é oriunda da imposição de forma fraca das condições de interface $[u]_e = 0$ e $[\nabla u]_e = 0$, a qual é dada por:

$$\sum_K \left[\int_{\partial K} \nabla u_h \cdot \mathbf{n}_K \mu_h ds + \int_{\partial K} \beta (\lambda - u_h) \mu_h ds \right] = 0, \quad \forall \mu_h \in \mathcal{M}_h^k. \quad (6)$$

Por fim, chega-se na seguinte formulação variacional associada ao problema local

Formulação Variacional Híbrida (FVH): Para cada $t \in (0, T]$, encontrar $u_h \in \mathcal{V}_h^k$ e $\lambda \in \mathcal{M}_h^k$ tais que satisfaçam as Eq. (5) e Eq. (6).

3 DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL

Dentre diversos esquemas numéricos utilizados para aproximar equações diferenciais parciais transientes, os métodos semi-implícitos destacam-se pela possibilidade de tratar diferentes termos de forma implícita ou explícita. Como mencionado anteriormente, quando o termo $R(u)$ da Eq. (1) é não linear, abordagens totalmente implícitas resultam na necessidade de resolver sistemas não lineares, tornando o processo de aproximação mais caro computacionalmente. Por esse motivo, tratar o termo reativo de forma explícita torna-se bastante interessante em termos do custo computacional envolvido.

Dentro desse contexto, [Ascher et al. \(1995\)](#) apresenta uma família de esquemas IMEX para a integração temporal em problemas de advecção-difusão e reação-difusão. [Ascher et al. \(1995\)](#) também demonstra em seu trabalho algumas análises de estabilidade e em [Crouzeix \(1980\)](#) podem ser encontrados alguns testes de convergência e estabilidade.

Seja uma partição do intervalo $[0, T]$ dada por $\mathcal{J} = \{t_0 = 0, t_1, \dots, t_N = T\}$, com o tamanho do passo de tempo sendo $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ e $u(t^n)$ aproximado por u^n . Um subconjunto da família de esquemas IMEX, denominados SBDF (*Semi-Implicit Backward Differentiation Formula*), são apresentados a seguir, aplicados na Eq. (1).

SBDF1: Esta abordagem de primeira ordem é dada por

$$u^{n+1} - u^n = \Delta t A u^{n+1} + \Delta t R(u^n). \quad (7)$$

Nota-se que o método acima pode ser visto como Euler implícito para o operador A e Euler explícito para o operador $R(u)$.

SBDF2: Esta abordagem pode ser vista como a aplicação do método BDF (*Backward Differentiation Formula*) de ordem 2 para o operador A , com o termo de reação aproximado de maneira

explícita. Assim, a discretização de segunda ordem para a Eq. (1) produz:

$$\frac{1}{2\Delta t} [3u^{n+1} - 4u^n + u^{n-1}] = Au^{n+1} + 2R(u^n) - R(u^{n-1}). \quad (8)$$

SBDF3: Este método semi-implícito de terceira ordem é dado por:

$$\frac{1}{\Delta t} \left(\frac{11}{6}u^{n+1} - 3u^n + \frac{3}{2}u^{n-1} - \frac{1}{3}u^{n-2} \right) = Au^{n+1} + 3R(u^n) - 3R(u^{n-1}) + R(u^{n-2}). \quad (9)$$

SBDF4: De maneira similar aos métodos anteriores, este método de quarta é escrito como segue

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{25}{12}u^{n+1} - 4u^n + 3u^{n-1} - \frac{4}{3}u^{n-2} + \frac{1}{4}u^{n-3} \right) \\ = Au^{n+1} + 4R(u^n) - 6R(u^{n-1}) + 4R(u^{n-2}) - R(u^{n-3}). \end{aligned} \quad (10)$$

4 FORMULAÇÃO HÍBRIDA COMPLETAMENTE DISCRETA

Nesta seção, a formulação hibridizada de elementos finitos apresentada na Seção 2 é aplicada em conjunto com os métodos semi-implícitos descritos na seção anterior, com o propósito de obter formulações para aproximar problemas de reação-difusão transiente. Sejam as seguintes formas bilineares $a(u_h, v_h)$, $b(\lambda, v_h)$ e a forma linear $f(v_h)$ dadas por:

$$\begin{aligned} a(u_h, v_h) &= (\nabla u_h, \nabla v_h)_K - \int_{\partial K} \nabla u_h \cdot \mathbf{n}_K v_h ds - \int_{\partial K} \nabla v_h \cdot \mathbf{n}_K u_h ds + \int_{\partial K} \beta u_h v_h ds \\ b(\lambda, v_h) &= \int_{\partial K} \nabla v_h \cdot \mathbf{n}_K \lambda ds - \int_{\partial K} \beta \lambda v_h ds \\ f(v_h) &= (f, v_h)_K \end{aligned} \quad (11)$$

Formulação Híbrida Completamente Discreta 1 (FHCD1): Nesta abordagem, a FVH é aplicada com o método **SBDF1**. Dessa forma, para cada $K \in \mathcal{T}_h$ e t_n (com $n = 0, \dots, N-1$), encontrar $(u_h^{n+1}, \lambda^{n+1}) \in \mathcal{V}_h^k \times \mathcal{M}_h^k$, tais que:

$$\begin{aligned} (u_h^{n+1}, v_h)_K + \Delta t [a(u_h^{n+1}, v_h) + b(\lambda^{n+1}, v_h)] = \Delta t f(v_h) \\ + \Delta t (R(u_h^n), v_h)_K + (u_h^n, v_h)_K, \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h^k \end{aligned} \quad (12.1)$$

$$\sum_K \left[\int_{\partial K} \nabla u_h^{n+1} \cdot \mathbf{n}_K \mu_h ds + \int_{\partial K} \beta (\lambda^{n+1} - u_h^{n+1}) \mu_h ds \right] = 0, \quad \forall \mu_h \in \mathcal{M}_h^k. \quad (12.2)$$

Formulação Híbrida Completamente Discreta 2 (FHCD2): Nesta abordagem, a FVH é aplicada com o método **SBDF2**. Assim, para cada $K \in \mathcal{T}_h$ e t_n (com $n = 0, \dots, N-1$), encontrar $(u_h^{n+1}, \lambda^{n+1}) \in \mathcal{V}_h^k \times \mathcal{M}_h^k$, tais que:

$$\begin{aligned} (u_h^{n+1}, v_h)_K + \frac{2}{3} \Delta t [a(u_h^{n+1}, v_h) + b(\lambda^{n+1}, v_h)] &= \frac{2}{3} \Delta t f(v_h) \\ + \frac{4}{3} \Delta t (R(u_h^n), v_h)_K - \frac{2}{3} \Delta t (R(u_h^{n-1}), v_h)_K + \frac{4}{3} (u_h^n, v_h)_K - \frac{1}{3} (u_h^{n-1}, v_h)_K, \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h^k \end{aligned} \quad (13.1)$$

$$\sum_K \left[\int_{\partial K} \nabla u_h^{n+1} \cdot \mathbf{n}_K \mu_h ds + \int_{\partial K} \beta (\lambda^{n+1} - u_h^{n+1}) \mu_h ds \right] = 0, \quad \forall \mu_h \in \mathcal{M}_h^k. \quad (13.2)$$

Formulação Híbrida Completamente Discreta 3 (FHCD3): A combinação da **FVH** com o método **SBDF3** produz: para cada $K \in \mathcal{T}_h$ e t_n (com $n = 0, \dots, N-1$), encontrar $(u_h^{n+1}, \lambda^{n+1}) \in \mathcal{V}_h^k \times \mathcal{M}_h^k$, tais que:

$$\begin{aligned} (u_h^{n+1}, v_h)_K + \frac{6}{11} \Delta t [a(u_h^{n+1}, v_h) + b(\lambda^{n+1}, v_h)] &= \frac{6}{11} \Delta t f(v_h) \\ + \frac{18}{11} \Delta t (R(u_h^n), v_h)_K - \frac{18}{11} \Delta t (R(u_h^{n-1}), v_h)_K + \frac{6}{11} \Delta t (R(u_h^{n-2}), v_h)_K \\ + \frac{18}{11} (u_h^n, v_h)_K - \frac{9}{11} (u_h^{n-1}, v_h)_K + \frac{2}{11} (u_h^{n-2}, v_h)_K, \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h^k \end{aligned} \quad (14.1)$$

$$\sum_K \left[\int_{\partial K} \nabla u_h^{n+1} \cdot \mathbf{n}_K \mu_h ds + \int_{\partial K} \beta (\lambda^{n+1} - u_h^{n+1}) \mu_h ds \right] = 0, \quad \forall \mu_h \in \mathcal{M}_h^k. \quad (14.2)$$

Formulação Híbrida Completamente Discreta 4 (FHCD4): De forma similar aos esquemas anteriores, a **FVH** é aplicada com o método **SBDF4**. Logo, para cada $K \in \mathcal{T}_h$ e t_n (com $n = 0, \dots, N-1$), encontrar $(u_h^{n+1}, \lambda^{n+1}) \in \mathcal{V}_h^k \times \mathcal{M}_h^k$, tal que:

$$\begin{aligned} (u_h^{n+1}, v_h)_K + \frac{12}{25} \Delta t [a(u_h^{n+1}, v_h) + b(\lambda^{n+1}, v_h)] &= \frac{12}{25} \Delta t f(v_h) \\ + \frac{48}{25} \Delta t (R(u_h^n), v_h)_K - \frac{72}{25} \Delta t (R(u_h^{n-1}), v_h)_K + \frac{48}{25} \Delta t (R(u_h^{n-2}), v_h)_K \\ - \frac{12}{25} \Delta t (R(u_h^{n-3}), v_h)_K + \frac{48}{25} (u_h^n, v_h)_K - \frac{36}{25} (u_h^{n-1}, v_h)_K + \frac{16}{25} (u_h^{n-2}, v_h)_K \\ - \frac{3}{25} (u_h^{n-3}, v_h)_K, \quad \forall v_h \in \mathcal{V}_h^k \end{aligned} \quad (15.1)$$

$$\sum_K \left[\int_{\partial K} \nabla u_h^{n+1} \cdot \mathbf{n}_K \mu_h ds + \int_{\partial K} \beta (\lambda^{n+1} - u_h^{n+1}) \mu_h ds \right] = 0, \quad \forall \mu_h \in \mathcal{M}_h^k. \quad (15.2)$$

Com relação a implementação computacional dos esquemas **FHCD1**, **FHCD2**, **FHCD3** e **FHCD4**, a maneira mais eficiente é empregar a técnica de condensação estática, eliminando os graus de liberdade da variável u no nível do elemento $K \in \mathcal{T}_h$ em favor dos graus de liberdade do multiplicador de Lagrange. Dessa forma, o sistema global envolvido depende somente de λ , e com isso, essa opção de resolução torna-se muito eficiente computacionalmente por reduzir de forma considerável a dimensão do sistema global. Em linhas gerais, os sistemas (12), (13), (14) e (15) são resolvidos como segue: com a condensação estática, isola-se u^{n+1} das equações

(12.1), (13.1), (14.1) e (15.1) para obter u^{n+1} em função de λ^{n+1} . Substituindo esses resultados nas equações (12.2), (13.2), (14.2) e (15.2), resolve-se o sistema global para λ^{n+1} , e por fim, calcula-se a variável u^{n+1} localmente. Destaca-se ainda que as soluções u^{n-1} , u^{n-2} e u^{n-3} precisam ser aproximadas nos primeiros passos de tempo (por exemplo, através do método SBDF1 com Δt suficientemente pequeno) para o cômputo dos termos de reação nos métodos SBDF.

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

Os experimentos numéricos apresentados nesta seção foram implementados utilizando a linguagem de programação C++ com o auxílio da biblioteca *deal.II* (Bangerth et al., 2007). Os modelos foram gerados em domínios bidimensionais ($\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$) e as malhas foram formadas por elementos quadriláteros com $N_K \times N_K$ elementos. Objetivando-se validar as formulações **FHCD1**, **FHCD2**, **FHCD3** e **FHCD4**, foram realizados testes de convergência em um problema clássico de reação-difusão, denominado Modelo de Gray-Scott (MGS) (Gray e Scott, 1983, 1985). Esse modelo é composto por um sistema de EDPs que conseguem reproduzir uma variedade de padrões a partir da reação e difusão de espécies químicas. O MGS pode ser descrito por

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_1 \Delta u + F(1 - u) - uw^2 \quad \text{em } \Omega \times [0, T], \quad (16.1)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = d_2 \Delta w - (F + \bar{k})w + uw^2 \quad \text{em } \Omega \times [0, T], \quad (16.2)$$

$$\nabla u \cdot \mathbf{n} = \nabla w \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sobre } \partial\Omega \times [0, T], \quad (16.3)$$

$$u(x, y, t = 0) = u^0(x, y) \quad \text{em } \Omega, \quad (16.4)$$

$$w(x, y, t = 0) = w^0(x, y) \quad \text{em } \Omega, \quad (16.5)$$

onde u e w são espécies químicas; d_1 e d_2 são os coeficientes de difusão das espécies u e w , respectivamente; F e \bar{k} são parâmetros que controlam a reação das espécies.

Para fins de testes de convergência, a seguinte solução exata será utilizada:

$$u_e(x, y, t) = \cos(\pi x) \cos(\pi y) \sin(t), \quad (17.1)$$

$$w_e(x, y, t) = 2 \cos(\pi x) \cos(\pi y) \sin(t). \quad (17.2)$$

Adotou-se os seguintes parâmetros: $d_1 = d_2 = F = 1$, $\bar{k} = 0$, $\beta_0 = 10$, tempo de simulação $T = 1$ e tamanho do passo no tempo $\Delta t = h^{\frac{k+1}{\theta}}$, onde θ denota a ordem do método de discretização no tempo e k é a ordem de aproximação polinomial.

Destaca-se que devido ao termo de reação não linear, a Eq. (16) não possui uma solução exata de forma fechada e explícita. Por isso, ao empregar a Eq. (17) como solução exata, termos fontes irão surgir na Eq. (16.1) e Eq. (16.2) a fim de manter as igualdades válidas.

Sendo assim, os resultados obtidos são apresentados nas tabelas a seguir.

Grau (k)	Malha ($N_K \times N_K$)	Erro ($\ u_e - u_h\ _{L^2}$)	Ordem	Erro ($\ w_e - w_h\ _{L^2}$)	Ordem
1	4×4	1,4132e-02	-	3,4169e-02	-
1	8×8	3,4847e-03	2,02	8,5882e-03	1,99
1	16×16	8,6794e-04	2,01	2,1500e-03	2,00
1	32×32	2,1678e-04	2,00	5,3770e-04	2,00

Tabela 1: Erro e taxa de convergência para a **FHCD1**.

Grau (k)	Malha ($N_K \times N_K$)	Erro ($\ u_e - u_h\ _{L^2}$)	Ordem	Erro ($\ w_e - w_h\ _{L^2}$)	Ordem
1	8×8	3,6400e-03	-	8,9793e-03	-
1	16×16	9,3498e-04	1,96	2,2053e-03	2,03
1	32×32	2,3815e-04	1,97	5,4522e-04	2,02
1	64×64	6,0160e-05	1,98	1,3551e-04	2,01

Tabela 2: Erro e taxa de convergência para a **FHCD2**.

Grau (k)	Malha ($N_K \times N_K$)	Erro ($\ u_e - u_h\ _{L^2}$)	Ordem	Erro ($\ w_e - w_h\ _{L^2}$)	Ordem
2	16×16	8,5325e-05	-	8,0193e-05	-
2	32×32	1,1461e-05	2,90	1,1436e-05	2,81
2	64×64	1,4637e-06	2,97	1,4693e-06	2,96
2	128×128	1,8457e-07	2,99	1,8583e-07	2,98

Tabela 3: Erro e taxa de convergência para a **FHCD3**.

Grau (k)	Malha ($N_K \times N_K$)	Erro ($\ u_e - u_h\ _{L^2}$)	Ordem	Erro ($\ w_e - w_h\ _{L^2}$)	Ordem
3	16×16	3,8143e-05	-	1,8276e-04	-
3	32×32	4,2245e-07	6,5	4,6935e-07	8,61
3	64×64	2,1015e-08	4,33	2,4771e-08	4,24
3	128×128	1,1188e-09	4,23	1,2968e-09	4,26

Tabela 4: Erro e taxa de convergência para a **FHCD4**.

As Tabelas 1, 2, 3 e 4 apresentam os erros e as taxas de convergência das aproximações numéricas obtidas para o MGS, empregando os esquemas **FHCD1**, **FHCD2**, **FHCD3** e **FHCD4**, respectivamente. Em todas as tabelas, nota-se o decaimento do erro de acordo com o refinamento da malha e a ordem do método convergindo para a taxa esperada. Para o mesmo nível de refinamento da malha, observa-se também a redução do erro quando o grau dos polinômios de interpolação e a ordem do método aumentam, sendo essa uma das principais características que justificam a escolha por métodos de alta ordem. Com base nos resultados encontrados, pode-se afirmar que as formulações apresentadas neste trabalho fornecem soluções precisas e de alta ordem no tempo e espaço para problemas de reação-difusão.

6 CONCLUSÕES

No presente trabalho, formulações híbridas de elementos finitos foram combinadas com esquemas semi-implícitos (especificamente com os métodos SBDF) com o intuito de construir aproximações de alta ordem para problemas de reação-difusão. Observou-se que os esquemas **FHCD1**, **FHCD2**, **FHCD3** e **FHCD4** apresentaram a taxa de convergência esperada. Além disso, notou-se também uma maior precisão nos esquemas de alta ordem em relação aos de baixa ordem, sendo essa uma das principais vantagens que justificam a escolha por métodos de alta ordem.

Métodos híbridos de elementos finitos destacam-se pela eficiência e baixo custo computacional para gerar aproximações numéricas de alta ordem para a variável espacial, principalmente quando comparados com outras formulações clássicas de elementos finitos (como as de Galerkin contínuo e Galerkin descontínuo). Por outro lado, os métodos SBDF também apresentam alternativas de alta ordem e permitem tratar o termo de reação não linear de forma explícita. Dessa forma, conclui-se que a utilização de métodos híbridos de elementos finitos em conjunto com os métodos SBDF são altamente atrativos para problemas de reação-difusão.

Como perspectivas de trabalhos futuros, pretende-se combinar formulações híbridas de elementos finitos com a técnica de decomposição de operadores e realizar comparações com as abordagens apresentadas neste trabalho. Deseja-se também, estudar essas metodologias em problemas que descrevem fenômenos mais complexos.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Esse trabalho também foi apoiado pelo CNPq, UFJF e FAPEMIG.

REFERÊNCIAS

- Ascher U.M., Ruuth S.J., e Wetton B.T. Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 32(3):797–823, 1995.
- Babuška I. The finite element method with penalty. *Mathematics of computation*, 27(122):221–228, 1973.
- Bangerth W., Hartmann R., e Kanschat G. deal. ii—a general-purpose object-oriented finite element library. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 33(4):24, 2007.
- Brezzi F. e Fortin M. *Mixed and hybrid finite element methods*, volume 15. Springer Science & Business Media, 2012.
- Cockburn B. e Gopalakrishnan J. New hybridization techniques. *GAMM-Mitteilungen*, 28(2):154–182, 2005.
- Crouzeix M. Une méthode multiples implicite-explicite pour l'approximation des équations d'évolution paraboliques. *Numerische Mathematik*, 35(3):257–276, 1980.
- Fix G.M. Hybrid finite element methods. *SIAM review*, 18(3):460–484, 1976.
- Fraeijs de Veubeke B. Displacement and equilibrium models in the finite element method. *Stress analysis*, páginas chapter–9, 1965.
- Gray P. e Scott S. Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor: isolas and other forms of multistability. *Chemical Engineering Science*, 38(1):29–43, 1983.
- Gray P. e Scott S. Sustained oscillations and other exotic patterns of behavior in isothermal reactions. *The Journal of Physical Chemistry*, 89(1):22–32, 1985.
- Guyan R.J. Reduction of stiffness and mass matrices. *AIAA journal*, 3(2):380–380, 1965.

- Hasnain S., Saqib M., e Al-Harbi N. Finite difference implicit schemes to coupled two-dimension reaction diffusion system. *Journal of Applied Mathematics and Physics*, 6(04):737, 2018.
- Igreja I. e Loula A.F. Stabilized velocity and pressure mixed hybrid dgfm for the stokes problem. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 112(7):603–628, 2017.
- Pereira R.R. *Métodos de Diferenças Finitas para Problemas de Difusão e Reação Não Lineares*. Tesis de Doutorado, Laboratório Nacional de Computação Científica, 2019.
- Raviart P.A. e Thomas J.M. A mixed finite element method for 2-nd order elliptic problems. Em *Mathematical aspects of finite element methods*, páginas 292–315. Springer, 1977.
- Strang G. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM journal on numerical analysis*, 5(3):506–517, 1968.